マルチボンディック法について

都立大院理　山口 智明[1], 川島 直輝, 岡部 豊

メトロポリス法や熱浴法はモンテカルロシミュレーションの標準的手法として確立しているが、スローダイナミックスの問題を克服する種々の新しいアルゴリズムが提案されている。近年提案されたモンテカルロ法の手法の一つに、Janke と Kappler によって提案されたマルチボンディック法 [1] がある。マルチボンディック法はマルチカノニカル法とクラスターアルゴリズムを合わせることを試みた方法であり、状態をクラスターで更新させながらグラフ空間をランダムウォークさせる方法である。我々はマルチボンディック法の改良等を行なった [2, 3]。

1　ボンド数に関する分配関数

マルチボンディック法はグラフの数に関しての状態密度を直接的に求める方法である。具体的な例として、強磁性 Q 状態 ポッツ模型を考える。そのハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i,\sigma_j}, \quad \sigma_i = \{1, \cdots, Q\} \tag{1}$$

で与えられる。S を状態、β を逆温度、n_b をサイト間に張り付けるグラフ数 (ボンド数) とし、分配関数を Fortuin-Kasteleyn 表示 [4] で書くと、

$$Z(T) = \sum_{S,G} (e^{\beta} - 1)^{n_b(G)} \Delta(S, G) \tag{2}$$

となる。ここで G はグラフであり、$\Delta(S,G)$ は S と G が矛盾しないとき、1 となり、それ以外は 0 となる関数である。N_B をスピン間の交換相互作用の数とし、上式でボンド数 n_b に関してくくり出すと、

$$Z(T) = \sum_{n_b=0}^{N_B} \Omega(n_b)(e^{\beta} - 1)^{n_b} \tag{3}$$

となる。ここで $\Omega(n_b)$ は

$$\Omega(n_b) \equiv \sum_{\{G|n_b(G)=n_b\}} \sum_{S} \Delta(S, G)$$

で定義される、ボンド数 n_b に関する状態密度である。マルチボンディック法はこの $\Omega(n_b)$ を直接的に求める方法である。物理量 A の熱平均は、

$$\langle A \rangle_{\beta} = \frac{\sum_{n_b=0}^{N_B} \langle A \rangle_{n_b} \Omega(n_b)(e^{\beta} - 1)^{n_b}}{Z(T)} \tag{4}$$

で与えられる。ここで $\langle \cdots \rangle_{n_b}$ は n_b に関するミクロカノニカル平均であり、シミュレーションでのサンプル量に置き換える。

[1]E-mail: chiaki@phys.metro-u.ac.jp

2 ボンド数に関するブロードヒストグラム関係式

Oliveira 等はエネルギーに関するブロードヒストグラム関係式を厳密に導いた [5]。それに対して、我々はボンド数に関するブロードヒストグラム関係式を厳密に導いた [3]。ボンド数に関するブロードヒストグラム関係式は

$$\Omega(n_b)\langle N(G, n_b \to n_b+1)\rangle_{n_b} = \Omega(n_b+1)\,\langle N(G', n_b+1 \to n_b)\rangle_{n_b+1} \tag{5}$$

である。上式の左辺の $\langle N(G, n_b \to n_b+1)\rangle_{n_b}$ は、ボンド数 n_b から n_b+1 にすることのできる可能性の数であり、

$$\langle N(G, n_b \to n_b+1)\rangle_{n_b} = \langle n_p\rangle_{n_b} - n_b \tag{6}$$

で与えられ、ここで n_p は

$$n_p(S) \equiv \sum_{\langle i,j\rangle} \delta_{\sigma_i(S),\sigma_j(S)}$$

で定義される量である。$\delta_{c_i(G),c_j(G)}$ をサイト i と j が同じクラスターに属していれば 1 を与える関数とすると、n_p の Improved estimator は

$$n_p(G) = \left(1 - \frac{1}{Q}\right)\sum_{\langle i,j\rangle} \delta_{c_i(G),c_j(G)} + \frac{N_B}{Q}$$

である。一方、式 (5) の右辺の $\langle N(G', n_b+1 \to n_b)\rangle_{n_b+1}$ は、ボンド数 n_b+1 から n_b にすることのできる可能性の数であり、

$$\langle N(G', n_b+1 \to n_b)\rangle_{n_b+1} = n_b + 1 \tag{7}$$

で与えられる。$Z(T \to \infty) = Q^N$ および、式 (5)、(6) と (7) より、

$$\Omega(n_b) = Q^N \prod_{l=0}^{n_b-1} \left(\frac{\langle n_p\rangle_{n_b=l} - l}{l+1}\right) \tag{8}$$

となる。上式より、$\langle n_p\rangle_{n_b}$ を計算すれば、状態密度 $\Omega(n_b)$ が計算できることがわかる。

3 クラスターで状態の更新を行なうフラットヒストグラム法

前の章で、$\langle n_p\rangle_{n_b}$ を計算すれば、状態密度 $\Omega(n_b)$ が計算できることがわかった。$\langle n_p\rangle_{n_b}$ の計算はどのような方法であってもよい。最も有名なクラスターアルゴリズムの一つである Swendsen-Wang アルゴリズム [6] でも計算することができる。しかし、ここではクラスターで状態の更新を行なうフラットヒストグラム法 [3] について書くことにする。Wang によって提案されたシングルスピンフリップで状態の更新を行なうフラットヒストグラム法 [7] をクラスターで状態を更新させるようにしたものに、この方法が対応している。$\delta_{\sigma_i(S),\sigma_j(S)} = 1$ のボンドに対して、

$$P(n_b \to n_b - 1) = \frac{\langle n_p\rangle_{n_b-1} + 1 - n_b}{\langle n_p\rangle_{n_b-1} + 1} \tag{9}$$

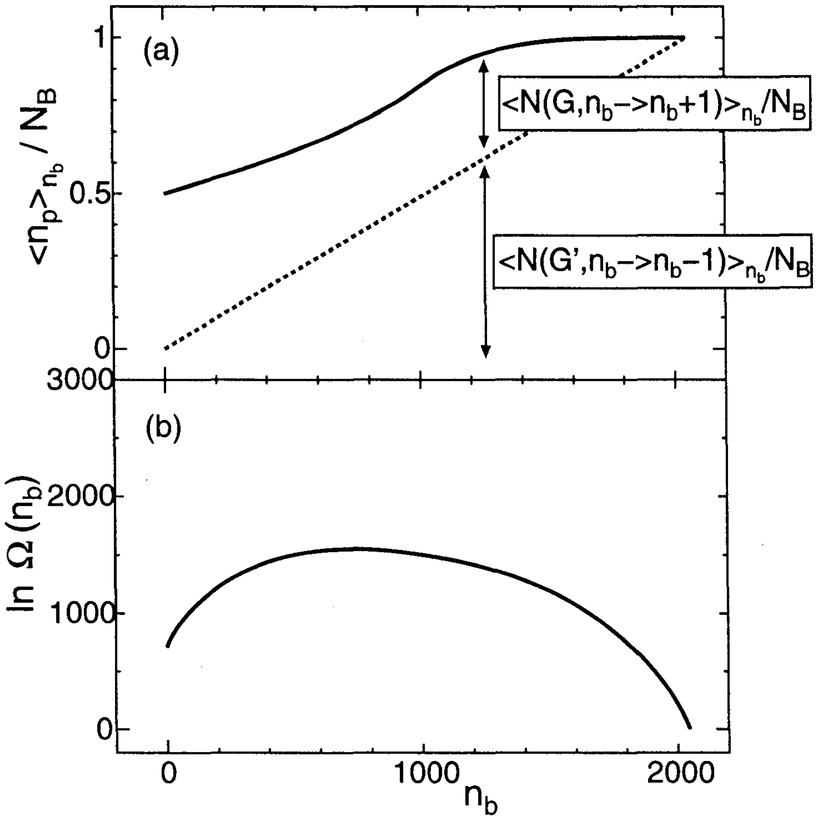

図 1: (a) $\langle n_p \rangle_{n_b}/N_B$。(b) 状態密度 $\ln\Omega(n_b)$。クラスターで状態を更新するフラットヒストグラム法。2 次元イジング模型 ($N = 32 \times 32$) でモンテカルロ数は 5×10^7sweeps。

と

$$P(n_b \to n_b + 1) = \frac{n_b + 1}{\langle n_p \rangle_{n_b} + 1} \tag{10}$$

の遷移確率で、ボンドの更新を行なう。$\delta_{\sigma_i(S),\sigma_j(S)} = 0$ のボンドに関しては、確率 1 でボンドは切ったままにする。全ボンド数分、ボンドの張り付けに関する試行を行なった後、ボンドが繋がってできたそれぞれのクラスターを確率 $1/Q$ でそれぞれの状態にフリップして状態を更新する。このように状態の更新を行うことにより、ボンド数 n_b に関するヒストグラム $H(n_b)$ が n_b に依存しなくなり、それは $\langle n_p \rangle_{n_b}$ が正しく求まったことを示す。

この方法で計算した例を図 1、2 に示す。方法の有効性に関しての議論等は論文の方を参照されたい [2, 3]。

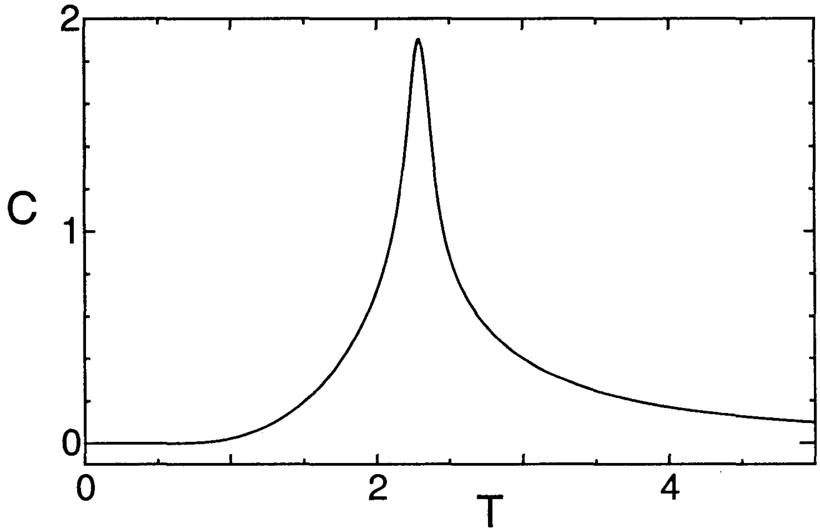

図 2: 温度と比熱の関係。図 1 の状態密度から計算したもの。

参考文献

[1] W. Janke and S. Kappler, Phys. Rev. Lett. **74**, 212 (1995).

[2] C. Yamaguchi, N. Kawashima, to appear in Phys. Rev. E, cond-mat/0201527.

[3] C. Yamaguchi, N. Kawashima, and Y. Okabe, cond-mat/0205578.

[4] P. W. Kasteleyn and C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26**, 11 (1969); C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn, Physica **57**, 536 (1972).

[5] P. M. C. de Oliveira, Eur. Phys. J. B **6**, 111 (1998); B. A. Berg and U. H. E. Hansmann, Eur. Phys. J. B **6**, 395 (1998).

[6] R. H. Swendsen and J. -S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).

[7] J. -S. Wang, Eur. Phys. J. B **8**, 287 (1998).